

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Drell S. D., Yan T. M. Massive lepton-pair production in hadron-hadron collisions at high energies // Phys. Rev. Letters. 1970. Vol. 25 (5). P. 316.
2. Measurement of the Drell – Yan cross section in pp collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV / S. Chatrchyan [et al.] // J. of High Energy Physics. 2011. Vol. 10. P. 1–41.
3. Measurement of the differential and double-differential Drell – Yan cross sections in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV / S. Chatrchyan [et al.] // J. of High Energy Physics. 2013. Vol. 12. P. 1–62.
4. Energy calibration and resolution of the CMS electromagnetic calorimeter in pp collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV / S. Chatrchyan [et al.] // J. of Instrumentation. 2013. Vol. 8, № 9. P. 09009.
5. Alcaraz J. Early Electroweak Measurements in CMS and ATLAS // Proc. of 42<sup>nd</sup> Recontres de Moriond on Electroweak Interactions and Unified Theories (10–17 Mar. 2007, La Thuile, Italy). La Thuile, 2007.
6. Study of Drell – Yan Di-muon Production with the CMS Detector / I. Belotelov [et al.]. Geneva, 2006.
7. Lanyov A., Shmatov S. Studies of high-mass Drell – Yan dimuon events in the CMS experiment // Nucl. Phys. B Proc. Suppl. 2007. Vol. 177. P. 302–304.
8. Combination of CDF and D0 W-Boson mass measurements / T. Aaltonen [et al.] // Phys. Rev. D. 2013. Vol. 88, № 5. P. 052018.
9. Arkani-Hamed N., Dimopoulos S., Dvali G. The hierarchy problem and new dimensions at a millimeter // Phys. Letters B. 1998. Vol. 429, № 3. P. 263–272; Pomarol A., Mariano Quirós. The standard model from extra dimensions // Phys. Letters B. 1998. Vol. 438, № 3. P. 255–260; Randall L., Sundrum R. Large mass hierarchy from a small extra dimension // Phys. Rev. Letters. 1999. Vol. 83, № 17. P. 3370.
10. Kokorelis C. Exact standard model structures from intersecting D5-branes // Nucl. Phys. B. 2004. Vol. 677, № 1. P. 115–163.
11. Dittmaier S., Huss A., Schwinn C. Mixed QCD – electroweak  $O(\alpha\alpha)$  corrections to Drell – Yan processes in the resonance region: Pole approximation and non-factorizable corrections // Nucl. Phys. B. 2014.
12. Mosolov V. A., Shumeiko N. M. Electromagnetic effects in Drell – Yan processes // Nucl. Phys. B. 1981. Vol. 186, № 3. P. 397–411; Soroko A., Shumeiko N. // Yad. Fiz. 1990. Vol. 52. P. 514.
13. Electroweak radiative corrections to neutral-current Drell – Yan processes at hadron colliders / U. Baur [et al.] // Phys. Rev. D. 2002. Vol. 65, № 3. P. 033007.
14. Gavin R., Li Y., Petriello F., Quackenbush S. FEWZ 2.0: A code for hadronic Z production at next-to-next-to-leading order // Comp. Phys. Comm. 2011. Vol. 182, № 11. P. 2388–2403.
15. Neutral current Drell – Yan with combined QCD and electroweak corrections in the POWHEG BOX / L. Barzè [et al.] // Eur. Phys. J. C. 2013. Vol. 73. P. 2474.
16. One-loop corrections to the Drell – Yan process in SANC / A. Arbuzov [et al.] // Eur. Phys. J. C. 2008. Vol. 54, № 3. P. 451–460.
17. Zykunov V. A. Weak radiative corrections to the Drell – Yan process for large invariant mass of a dilepton pair // Phys. Rev. D. 2007. Vol. 75, № 7. P. 073019.
18. Denner A. Techniques for the Calculation of Electroweak Radiative Corrections at the One-Loop Level and Results for W-physics at LEP 200 // Fortschritte der Physik / Progress of Phys. 1993. Vol. 41, № 4. P. 307–420.
19. 't Hooft G., Veltman M. Regularization and renormalization of gauge fields // Nucl. Phys. B. 1972. Vol. 44, № 1. P. 189–213.
20. Hahn T., Perez-Victoria M. Automated one-loop calculations in four and D dimensions // Comp. Phys. Comm. 1999. Vol. 118, № 2. P. 153–165.

Поступила в редакцию 05.11.2014.

**Егор Вячеславович Дыдышко** – научный сотрудник лаборатории физики частиц Национального научно-учебного центра физики частиц и высоких энергий БГУ.

**Хуан Гильермо Суарес** – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией фундаментальных взаимодействий Национального научно-учебного центра физики частиц и высоких энергий БГУ.

**Николай Максимович Шумейко** – доктор физико-математических наук, профессор, директор Национального научно-учебного центра физики частиц и высоких энергий БГУ.

УДК 501.508;551.510

С. А. ЛЫСЕНКО, М. М. КУГЕЙКО, В. В. ХОМИЧ

## ЛАЗЕРНО-ЛОКАЦИОННЫЕ И НЕФЕЛОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ КОНТРОЛЯ РЕСПИРАБЕЛЬНЫХ ЧАСТИЦ АЭРОЗОЛЯ В ГОРОДСКОМ ВОЗДУХЕ

Предложены методы оперативного мониторинга массовых концентраций взвешенных в воздухе частиц (аэрозоля) с диаметрами эквивалентных по объему сфер  $\leq 1$  мкм,  $\leq 2,5$  мкм,  $\leq 10$  мкм по данным лазерно-локационных и нефелометрических измерений. Методы основаны на регрессионных соотношениях между измеряемыми характеристиками аэрозольного светорассеяния и концентрациями аэрозольных фракций, полученных с использованием модели городского аэрозоля с варьируемыми распределениями частиц по размерам и комплексными показателями преломления частиц. Проведены замкнутые численные эксперименты по оптическому зондированию аэрозоля, демонстрирующие эффективность разработанных методов и их устойчивость к вариациям дисперсного и химического состава исследуемых частиц.

**Ключевые слова:** аэрозоль; респираторные частицы; массовая концентрация; оптическое зондирование; обратная задача.

We have developed methods for operative monitoring of the mass concentrations of airborne particles (aerosols) with the diameters of equivalent volume sphere  $\leq 1$   $\mu\text{m}$ ,  $\leq 2,5$   $\mu\text{m}$ ,  $\leq 10$   $\mu\text{m}$  by means of the lidar and nephelometric measurements which are robust to variations of microphysical parameters of the investigated particles. These methods are based on the regression relations between the

measured characteristics of aerosol light scattering and the mass concentrations of aerosol fractions constructed using an optical model for the urban aerosol with the varying particle size distribution and complex refractive index. The closed-loop numerical experiments with optical sensing of aerosol demonstrating effectiveness of the developed methods were conducted.

**Key words:** aerosol; respirable particles; mass concentration; optical sensing; inverse problem.

Среди неблагоприятных факторов окружающей среды, влияющих на здоровье населения, наибольшее негативное воздействие на здоровье человека оказывает загрязнение воздуха взвешенными частицами (аэрозолем). Результаты многочисленных эпидемиологических исследований однозначно указывают на взаимосвязь загрязнения воздуха с уровнем сердечно-сосудистых и респираторных заболеваний у населения. По данным последних исследований [1], примерно 2,1 млн смертей происходят ежегодно из-за увеличения объема мелкодисперсных (респирабельных) частиц в воздухе, которые могут проникать глубоко в легкие человека. Согласно американским и европейским стандартам по качеству атмосферного воздуха индикатором для выявления респирабельных частиц в воздухе служат массовые концентрации частиц  $PM_{10}$ ,  $PM_{2,5}$  и  $PM_{10}$  (particulate matter – твердые частицы) с диаметром эквивалентных по объему сфер, не превышающим 1 мкм, 2,5 мкм и 10 мкм соответственно.

В целях мониторинга пыли в технологических процессах, а также в воздухе рабочих и жилых помещений как наиболее простой и эффективный применяется нефелометрический метод, основанный на регистрации рассеянного светового потока при его прохождении через объем с частицами аэрозоля [2, 3]. Переход от измеряемого фотосигнала к массовой концентрации аэрозоля осуществляется с использованием расчетного или эмпирического коэффициента связи. Последний может изменяться в широких пределах в зависимости от микрофизических параметров аэрозоля (форма частиц, функция распределения по размерам, комплексный показатель преломления), поэтому точность и достоверность результатов нефелометрических измерений определяются главным образом стабильностью свойств аэрозоля.

Для централизованного мониторинга загрязненности различных районов города, а также для дистанционного определения источника загрязнения и исследования переноса аэрозоля в атмосфере наиболее перспективным является лазерно-локационный метод, основанный на измерении и анализе временной структуры света импульсного лазера, обратно рассеянного разными участками атмосферы [4, 5]. Однако данный метод пока не обеспечивает необходимую для практики точность из-за нерешенных методических задач, связанных со сложной и многопараметрической зависимостью регистрируемых сигналов.

В настоящей статье представлено описание разработанных авторами методов определения массовых концентраций респирабельных фракций аэрозоля по данным лазерно-локационных и нефелометрических измерений, устойчивых к погрешностям оптических измерений и к вариациям микрофизических параметров аэрозоля.

### Нефелометрический метод

С учетом недостатков существующих нефелометрических анализаторов аэрозольных загрязнений воздуха (влияние на точность измерений микрофизических параметров аэрозоля, низкая чувствительность к содержаниям в воздухе мелких и крупных частиц) нами разработан следующий метод определения массовых концентраций  $PM_X$  частиц городского аэрозоля с размерами  $X \leq 1$  мкм,  $\leq 2,5$  мкм,  $\leq 10$  мкм. В измерительный объем последовательно посылаются излучение с длинами волн  $\lambda_1 = 0,355$  мкм и  $\lambda_2 = 1,064$  мкм. Рассеянный свет улавливается фотоэлементами, установленными под углами  $\theta_1 = 5^\circ$  и  $\theta_2 = 20^\circ$  к падающему лучу. По детектируемым сигналам определяют коэффициенты аэрозольного светорассеяния  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$  ( $i = 1, 2; j = 1, 2$ ). Обратная задача аэрозольного светорассеяния решается на основе устойчивых регрессионных соотношений между  $PM_X$  и  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$ .

Крупные частицы обуславливают рассеяние под малыми углами ( $\theta_1$ ), тогда как в боковом рассеянии ( $\theta_2$ ) преобладает вклад более мелких частиц, поэтому одновременная регистрация рассеянного света в этих двух направлениях дает возможность судить о концентрациях  $PM_1$  и  $PM_{10}$  в исследуемом объеме воздуха. Для повышения точности определения  $PM_1$  и  $PM_{10}$  используются две длины волны зондирующего излучения, одна из которых ( $\lambda_1$ ) соответствует наибольшей эффективности светорассеяния мелких, другая ( $\lambda_2$ ) – крупных частиц. Комплексный анализ всех четырех измеряемых коэффициентов  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$  позволяет также определять концентрацию средних по размеру частиц  $PM_{2,5}$ .

Выбор конкретных значений для углов  $\theta_1$  и  $\theta_2$  в предложенной схеме измерений связан с двумя обстоятельствами. Во-первых, регистрация излучения, рассеянного под углами  $\theta_1 < 5^\circ$ , представляет значительные сложности технического характера, связанные с необходимостью разделения прямопрошедшего и рассеянного световых потоков, а также с явлением дифракции на оптических элементах излучателя. Во-вторых, использование углов  $\theta_2 > 20^\circ$  нецелесообразно в связи с существенно возрастающим влиянием комплексного показателя преломления (КПП) и формы частиц на их индикатрису рассеяния [6, 7].

Для получения регрессионных соотношений между  $PM_X$  и  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$  использовалась оптико-микрофизическая модель городского аэрозоля, принятая Всемирной метеорологической организацией [8]. Данная модель предполагает, что аэрозоль состоит из трех компонентов: сажевого ( $f=1$ ), водорастворимого ( $f=2$ ) и пылевого ( $f=3$ ). Каждый компонент характеризуется объемной концентрацией  $C_f$ , модальным радиусом  $x_f$  и полушириной  $\sigma_f$  распределения частиц по размерам, а также комплексным показателем преломления (КПП) аэрозольного вещества  $m_f(\lambda)$ . Для статистического моделирования аэрозольных характеристик светорассеяния необходимо задать диапазоны вариаций модельных параметров [9, 10]. Значения параметров  $x_f$  и  $\sigma_f$ , характерные для городских аэрозолей, приведены в работе [11]. Диапазоны вариаций  $C_f$  выбраны с тем расчетом, чтобы охватить ситуации в атмосфере, соответствующие фоновому уровню загрязненности воздуха и его экстремальной запыленности (или задымленности):  $C_1 + C_2 + C_3 = 10^{-3} - 10^0 \text{ мм}^3/\text{м}^3$ ,  $C_2 / C_1 = 0,05 - 10$ ,  $C_3 / C_2 = 0,1 - 200$ . Спектры КПП аэрозольных частиц моделировались как линейные комбинации:

$$m_f(\lambda) = \sum_i p_i m_{i,f}^*(\lambda) / \sum_i p_i,$$

где  $m_{i,f}^*$  – КПП вещества частиц [8, 12–17];  $p_i$  – весовые коэффициенты, варьируемые в диапазоне 0–1. Массовые концентрации  $PM_X$  рассчитывались на основе объемных концентраций и функции распределения частиц по размерам при плотности вещества частиц  $1,4 \text{ г/см}^3$ .

На основе смоделированного ансамбля из  $10^3$  реализаций  $PM_X$  и  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$  построены полиномиальные регрессии вида

$$\begin{aligned} \ln PM_X = & a_{00}^X + \sum_{m=1}^3 a_{1m}^X [\ln \beta(\lambda_1, \theta_1)]^m + \sum_{m=1}^3 a_{2m}^X [\ln \beta(\lambda_1, \theta_2)]^m + \\ & + \sum_{m=1}^3 a_{3m}^X [\ln \beta(\lambda_2, \theta_1)]^m + \sum_{m=1}^3 a_{4m}^X [\ln \beta(\lambda_2, \theta_2)]^m, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $a_{nm}^X$  – коэффициенты, значения которых для размерностей  $PM_X [\text{мкг/м}^3]$  и  $\beta [\text{км}^{-1} \text{ср}^{-1}]$  приведены в табл. 1.

Таблица 1

Коэффициенты  $a_{nm}^X$  регрессионной формулы (1)

$(n, m)$	$X = 1 \text{ мкм}$	$X = 2,5 \text{ мкм}$	$X = 10 \text{ мкм}$
(0, 0)	6,054 2	5,450 8	5,813 4
(1, 1)	–0,294 2	0,478 6	0,344 9
(1, 2)	0,045 9	–0,015 6	–0,155 1
(1, 3)	–0,000 9	–0,002 1	–0,013 3
(2, 1)	1,026 6	0,402 9	0,549 4
(2, 2)	–0,047 4	0,009 6	0,119 7
(2, 3)	–0,001 9	0,000 7	0,006 6
(3, 1)	–0,182 5	–0,120 5	0,743 0
(3, 2)	–0,048 3	0,000 8	0,030 2
(3, 3)	–0,003 9	–0,000 3	0,001 3
(4, 1)	0,368 9	0,292 8	–0,087 6
(4, 2)	0,047 9	0,010 4	0,054 8
(4, 3)	0,004 6	0,001 0	0,003 7

Погрешности определения  $PM_X$  с использованием полученных регрессий оценивались на основе тестового ансамбля реализаций  $PM_X$  и  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$ , сформированного путем вышеописанного статистического моделирования. Восстановление  $PM_X$  из тестовых реализаций  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$  проводилось с использованием формулы (1) при наложении на  $\beta(\lambda_i, \theta_j)$  случайных отклонений в пределах  $\delta\beta = 0 - 15 \%$ . Путем сравнения заданных и восстановленных значений  $PM_1$ ,  $PM_{2,5}$  и  $PM_{10}$  оценены погрешности разработанного метода, вызванные статистическим разбросом микрофизических параметров аэрозоля и погрешностями оптических измерений:  $\delta PM_1 = 10,8 - 14,6 \%$ ,  $\delta PM_{2,5} = 8,7 - 10,0 \%$ ,  $\delta PM_{10} = 8,2 - 11,2 \%$ .

Видно, что рассматриваемые характеристики аэрозольного светорассеяния обладают достаточно высокой информативностью относительно всех экологически значимых фракций аэрозоля, а решение обратной задачи с использованием полученных регрессий является устойчивым к погрешностям оптических измерений.

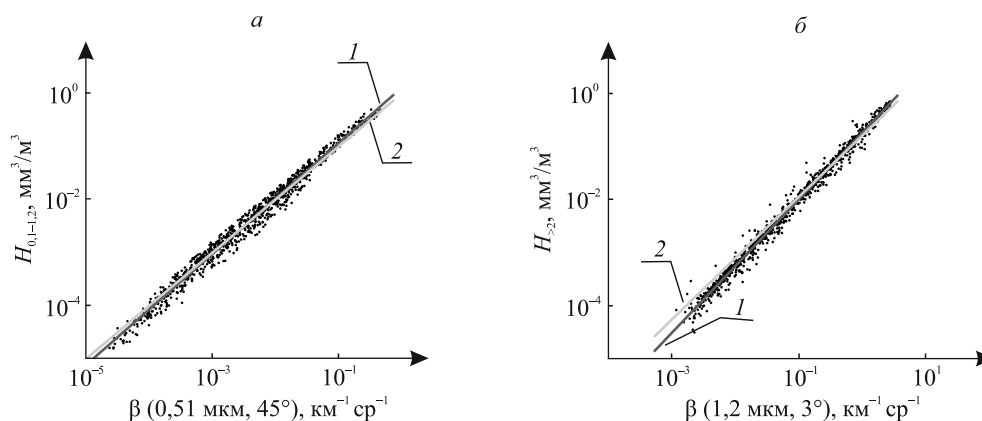


Рис. 1. Модельные совокупности точек  $\beta(0,51 \text{ мкм}, 45^\circ)$ ,  $H_{0,1-1,2}$  (а) и  $\beta(1,2 \text{ мкм}, 3^\circ)$ ,  $H_{>2}$  (б), отвечающие различным значениям модельных параметров, их логарифмические аппроксимации (1) и экспериментальные зависимости (2) (по [18, 19])

Поскольку при статистическом моделировании аэрозольных характеристик светорассеяния допускается произвольный выбор диапазонов вариаций модельных параметров, важно оценить достоверность оптико-микроструктурных корреляций, получаемых на основе используемой модели. Для этого проведено их сравнение с экспериментальными данными [18, 19], согласно которым существуют устойчивые статистические связи коэффициентов аэрозольного рассеяния на  $\lambda = 0,51 \text{ мкм}$  под углом  $45^\circ$  ( $\beta_1$ ) и на  $\lambda = 1,2 \text{ мкм}$  под углом  $3^\circ$  ( $\beta_2$ ) с объемными концентрациями субмикронной  $H_{0,1-1,2}$  (частицы с диаметрами 0,1–1,2 мкм) и грубодисперсной  $H_{>2}$  (частицы с диаметрами 2–20 мкм) фракций аэрозоля соответственно. Уравнения регрессии, описывающие эти связи, имеют вид [18, 19]:  $H_{0,1-1,2} = 1,0\beta_1^{1,0}$  и  $H_{>2} = 0,23\beta_2^{0,92}$ , где  $H_{2-20}$  и  $H_{0,1-1,2}$  измеряются в  $\text{мм}^3/\text{м}^3$ , а  $\beta_1$  и  $\beta_2$  – в  $\text{км}^{-1} \text{ср}^{-1}$ . Аналогичные регрессии можно получить в рамках используемой нами модели при заданной вариативности ее параметров. Совокупность точек  $(\beta_1, H_{0,1-1,2})$  и  $(\beta_2, H_{>2})$ , соответствующих  $10^3$  случайным комбинациям модельных параметров, представлена на рис. 1. Логарифмическая аппроксимация этих точек приводит к следующим уравнениям регрессии:  $H_{0,1-1,2} = 1,29\beta_1^{1,04}$  и  $H_{>2} = 0,25\beta_2^{1,0}$ . Коэффициенты полученных уравнений достаточно близки к аналогичным коэффициентам, соответствующим независимым экспериментальным ансамблям. Небольшие различия между теоретическими и экспериментальными зависимостями легко объяснимы физически. Во-первых, экспериментальные ансамбли соответствуют значительно более узким диапазонам вариаций микрофизических параметров аэрозоля, чем смоделированный набор данных. Как видно из рис. 1, а, экспериментальное уравнение хорошо описывает статистическую связь между  $H_{0,1-1,2}$  и  $\beta_1$  в диапазоне  $H_{0,1-1,2} = 0,001\text{--}0,06 \text{ мм}^3/\text{м}^3$ , соответствующем экспериментальному ансамблю [18]. В то же время теоретическая зависимость правомерна для значительно более широкого диапазона:  $H_{0,1-1,2} = 10^{-5}\text{--}0,5 \text{ мм}^3/\text{м}^3$ . Во-вторых, следует учесть, что концентрации  $H_{0,1-1,2}$  и  $H_{>2}$  в работах [18, 19] не измерялись непосредственно, а рассчитывались путем обращения данных оптических измерений. При этом в [19] использовалось распределение частиц по размерам в диапазоне диаметров эквивалентных по объему сфер 0,4–20 мкм. В наших расчетах используется диапазон 0,002–30 мкм, а в качестве концентрации  $H_{>2}$  принимается суммарный объем частиц в диапазоне 2–30 мкм.

Таким образом, статистические связи между оптическими и микрофизическими параметрами аэрозоля, получаемые в рамках используемой модели, адекватны свойствам реального аэрозоля и могут с успехом использоваться при обработке данных его оптического зондирования.

#### Лазерно-локационный метод

Дистанционное определение концентраций аэрозольных фракций в атмосферном воздухе по данным многоволнового лазерного зондирования включает восстановление из регистрируемых эхосигналов  $P(r)$  (где  $r$  – пространственная координата, отсчитываемая от источника излучения) профилей коэффициента аэрозольного ослабления  $\varepsilon(r)$  на длинах волн зондирующего излучения  $\lambda$  и решение обратной задачи аэрозольного светорассеяния для каждой точки зондируемой трассы.



Связь сигналов  $P(r)$  с оптическими параметрами аэрозоля (коэффициентами ослабления  $\epsilon$  и обратно-го рассеяния  $\beta_\pi$ ) описывается хорошо известным уравнением лазерной локации [4, 5]. Для его решения обычно используется предположение о неизменности лидарного отношения  $S = \epsilon/\beta_\pi$  по трассе зондирования. В этом случае лидарное уравнение может быть легко разрешено относительно профиля  $\epsilon(r)$ :

$$\epsilon(r) = 0,5P(r)r^2 \left[ \frac{1}{1-T^2} \int_{r_0}^{r_{\max}} P(x)x^2 dx - \int_{r_0}^r P(x)x^2 dx \right]^{-1}, \quad (2)$$

где  $T$  – оптическое пропускание трассы. Для горизонтальных и наклонных приземных трасс со сравнительно небольшими пространственными вариациями аэрозольных оптических параметров величину  $T$  можно определить непосредственно из лидарного сигнала методом наименьших квадратов:

$$\ln T = \sum_i \frac{r_i - r_0}{r_{\max} - r_0} \ln \left( \frac{P(r_i)r_i^2}{P(r_0)r_0^2} \right) / \sum_i \left( \frac{r_i - r_0}{r_{\max} - r_0} \right)^2, \quad (3)$$

где суммирование ведется по всем точкам  $r_i$  зондируемой трассы;  $r_0$  и  $r_{\max}$  – минимальная и максимальная дальности зондирования.

В тех случаях, когда лазерный луч проходит через аэрозольный шлейф от трубы промышленного предприятия или локального источника горения, формулы (2) и (3) следует использовать отдельно для участков трассы, соответствующих фоновой атмосфере и аэрозольному шлейфу. Определять ближнюю и дальнюю границы аэрозольного шлейфа на трассе зондирования можно путем нахождения двух наибольших значений функции

$$F(r) = \frac{d}{dr} \left[ \frac{S(r)/S(r + \Delta r)}{\int_{r_0}^r [S(x)/S(x + \Delta r)] r^3} \right], \quad (4)$$

где  $S(r) = P(r)r^2$ ,  $\Delta r$  – пространственное разрешение лидача [20]. При этом для определения точек пересечения аэрозольного шлейфа с зондирующим лучом не требуется использования пороговых значений сигналов, что повышает надежность измерений и облегчает обработку измеряемой информации.

Восстановление концентраций  $\text{PM}_X$  из спектральных коэффициентов  $\epsilon(\lambda_i)$  ( $i = 1, \dots, N_\lambda$ , где  $N_\lambda$  – количество длин волн лазерного зондирования) осуществляется с использованием регрессионных соотношений:

$$\ln \text{PM}_X = b_0^X + \sum_{k=1}^K \sum_{m=1}^3 b_{km}^X (\mathbf{y} \cdot \mathbf{v}_k)^m, \quad (5)$$

где  $\mathbf{y} = (y_i)$  – вектор результатов измерений с компонентами  $y_i = \ln \epsilon(\lambda_i)$ ,  $\mathbf{v}_k$  – собственные векторы его ковариационной матрицы;  $K$  – количество линейно независимых компонент  $\mathbf{y}$ , зависящее от погрешности измерения  $\epsilon(\lambda_i)$  [9, 21] (в общем случае  $K \leq N_\lambda$ );  $b_{km}^X$  – коэффициенты, полученные на основе результатов статистического моделирования  $\mathbf{y}$ . Использование в формуле (5) проекций вектора  $\mathbf{y}$  размерностью  $N_\lambda$  на собственный базис его ковариационной матрицы размерностью  $K < N_\lambda$  соответствует извлечению из измеряемых данных «полезного сигнала» и отбрасыванию «шума», что позволяет повысить устойчивость решения обратной задачи к погрешностям измерений. Выбор значения  $K$  основывается на замкнутых численных экспериментах по восстановлению  $\text{PM}_X$  по формуле (5) при наложении на коэффициенты  $\epsilon(\lambda_i)$  случайных отклонений в пределах погрешности измерений. Результаты таких экспериментов позволяют заключить, что при измерении  $\epsilon(\lambda)$  на длинах волн  $\lambda = 0,355, 0,532, 1,064$  и  $1,5$  мкм (применяемых в практике лазерного зондирования аэрозоля) с погрешностью 10–20 % для восстановления  $\text{PM}_X$  оптимально использовать  $K = 2$ . Компоненты векторов  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$  и коэффициенты регрессии (5), соответствующие вышеуказанным  $\lambda$ , приведены в табл. 2 и 3. Погрешности восстановления  $\text{PM}_1, \text{PM}_{2,5}$  и  $\text{PM}_{10}$  с использованием полученных регрессий составляют  $\delta \text{PM}_1 = 8\text{--}14\%$ ,  $\delta \text{PM}_{2,5} = 14\text{--}15\%$  и  $\delta \text{PM}_{10} = 11\text{--}13\%$ . Нижние границы диапазонов соответствуют случайным «возмущениям» спектральных коэффициентов  $\epsilon(\lambda)$  в пределах 1 %, верхние – в пределах 15 %.

Таблица 2

Собственные векторы ковариационной матрицы  $\ln \epsilon(\lambda)$ 

$\lambda$ , мкм	0,355	0,532	1,064	1,5
$\mathbf{v}_1$	0,498 83	0,501 56	0,502 29	0,497 31
$\mathbf{v}_2$	0,582 22	0,361 96	–0,270 41	–0,675 93

Коэффициенты  $b_{km}^X$  регрессионной формулы (5)

$(k, m)$	$X = 1 \text{ мкм}$	$X = 2,5 \text{ мкм}$	$X = 10 \text{ мкм}$
(0, 0)	3,075 08	4,586 53	6,603 11
(1, 1)	0,499 66	0,503 16	0,482 09
(1, 2)	0,000 13	0,001 30	-0,002 82
(1, 3)	0,000 03	0,000 11	-0,000 14
(2, 1)	3,767 61	1,067 03	0,211 06
(2, 2)	-2,642 06	-0,570 58	-1,735 40
(2, 3)	0,756 83	0,181 44	0,761 05

Рассмотрим пример определения  $PM_X$  разработанным методом на основе смоделированных сигналов лазерного зондирования аэрозоля на  $\lambda = 0,355, 0,532, 1,064$  и  $1,5 \text{ мкм}$ . Лидарные сигналы моделировались для трассы, проходящей через аэрозольный шлейф с высоким содержанием сажевых частиц. Пространственные вариации полной объемной концентрации частиц в шлейфе и вне его составляли 10 %, вариации относительного содержания аэрозольных фракций (сажевой, водорастворимой и пылевой) – 5 %. Оптические параметры аэрозоля (коэффициенты ослабления  $\epsilon$  и обратного рассеяния  $\beta_\pi$ ) рассчитывались по формулам теории Ми для полидисперсного ансамбля рассеивающих частиц [22]. Лидарные сигналы моделировались на основе уравнения лазерной локации [4, 5] в соответствии с модельными профилями  $\epsilon(r)$  и  $\beta_\pi(r)$ . В полученные сигналы искусственно вносился шумовой фон, соответствующий 25 % погрешности для конечных точек трассы зондирования.

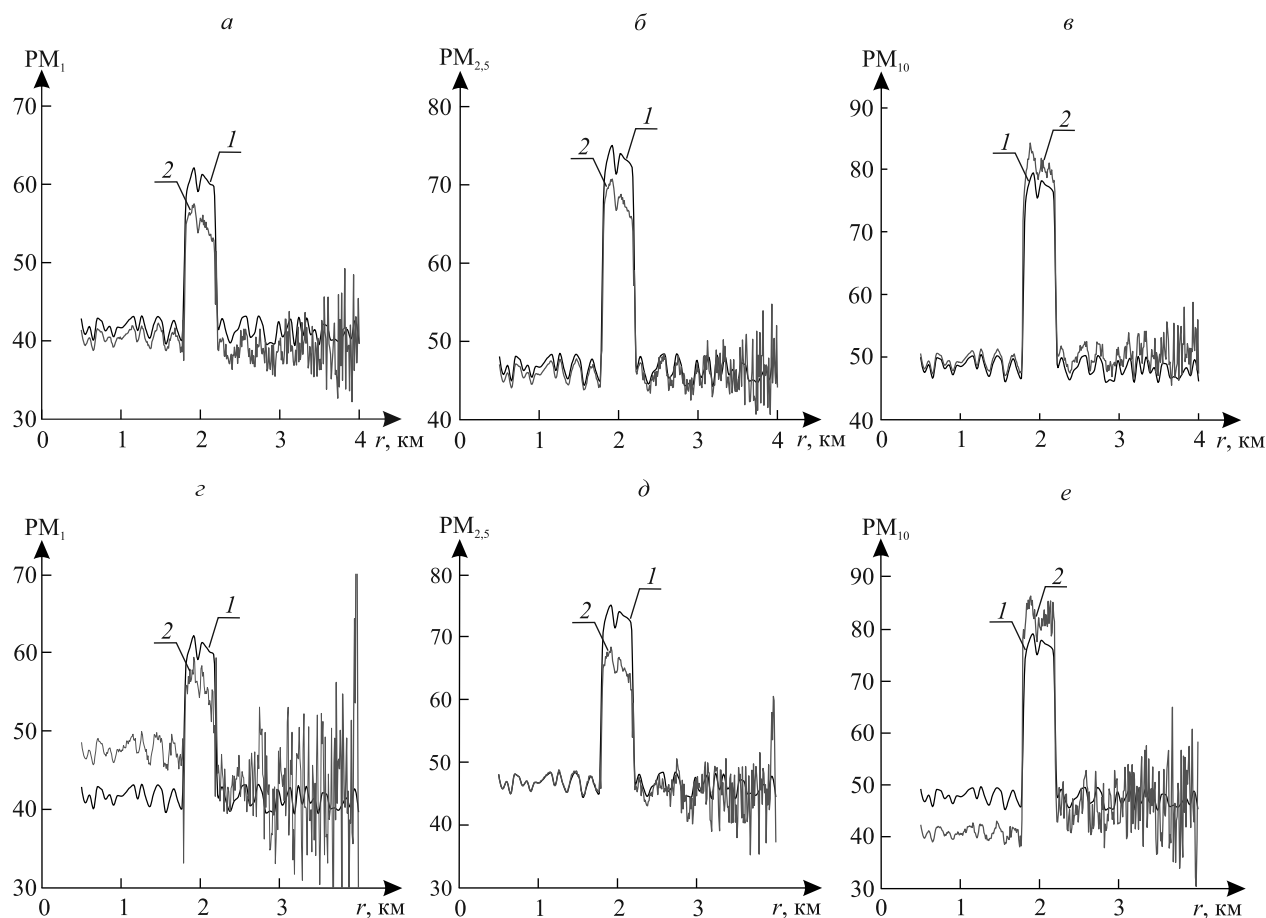


Рис. 2. Результаты восстановления профилей концентраций  $PM_1$  (а, а),  $PM_{2,5}$  (б, д) и  $PM_{10}$  (в, е),  $\text{мкг/м}^3$ , из смоделированных лидарных сигналов на четырех (а – в) и трех (а – в) длинах волн зондирующего излучения; 1 и 2 – соответственно заданные и восстановленные профили

Ближняя и дальняя границы аэрозольного шлейфа определялись по сигналам, соответственно как первый и второй глобальные максимумы функции (4). Далее методом наименьших квадратов рассчитывались оптические пропускания участков трассы, соответствующих фоновой атмосфере и аэрозольному шлейфу, по формуле (2) восстанавливались соответствующие им профили  $\varepsilon(r, \lambda)$  и решалась обратная задача по регрессионной формуле (5). Заданные и восстановленные профили  $PM_X(r)$  представлены на рис. 2, а – в.

Несмотря на малое количество длин волн оптического зондирования (по сравнению с количеством неизвестных параметров аэрозоля), их оказывается вполне достаточно для дистанционного определения массовых концентраций всех респираторных фракций аэрозоля. Для того чтобы оценить преимущество использования для лазерного зондирования аэрозоля длины волны излучения 1,5 мкм, на рис. 2, г – е, приведены результаты восстановления профилей  $PM_X(r)$  из сигналов, соответствующих лидарным системам на основе Nd : YAG<sup>3+</sup>-лазера ( $\lambda = 0,355, 0,532, 1,064$  мкм). Видно, что точность восстановления  $PM_1$  и  $PM_{10}$  в этом случае заметно хуже, а решение соответствующей обратной задачи более чувствительно к погрешностям измерений.

Представленные выше подходы к определению оптических и микрофизических параметров городских аэрозолей позволяют решать важную практическую задачу – выполнять дистанционные и локальные измерения концентраций всех аэрозольных фракций, используемых в медицинской экологии в качестве индикаторов загрязненности воздуха взвешенными частицами. Разработанные методы могут эффективно использоваться на автоматических станциях контроля загрязнения атмосферы с целью непрерывного локального мониторинга концентраций респираторных фракций аэрозоля в городском воздухе и для получения круговой панорамы распределения аэрозоля в воздушном бассейне населенного пункта.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Global premature mortality due to anthropogenic outdoor air pollution and the contribution of past climate change / R. A. Silva [et al.] // *Environ. Res. Lett.* 2013. Vol. 8, № 3. P. 034005.
2. Клименко А. П., Королев В. И., Шевцов В. И. Непрерывный контроль концентрации пыли. Киев, 1980.
3. Оптико-электронные методы изучения аэрозолей / С. П. Беляев [и др.]. М., 1981.
4. Зуев В. Е., Кауль Б. В., Самохвалов И. В. Лазерное зондирование промышленных аэрозолей. Новосибирск, 1986.
5. Креков Г. М., Кавкянов С. И., Крекова М. М. Интерпретация сигналов оптического зондирования атмосферы. Новосибирск, 1987.
6. Particle size analysis – Laser diffraction methods. Международный стандарт ISO 13320. 2009.
7. Veihelmann B., Konert M., van der Zande W. J. Size distribution of mineral aerosol: using light-scattering models in laser particle sizing // *Appl. Opt.* 2006. Vol. 45, № 23. P. 6022–6029.
8. World Climate Research Programme: A preliminary cloudless standard atmosphere for radiation computation // Report WCP-112, WMO/TD-24. Geneva, 1986.
9. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Лазерная спектрофелометрия аэродисперсных сред. Минск, 2012.
10. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Спектрофелометрические методы определения микрофизических характеристик пыли в аспирационном воздухе и отходящих газах цементных производств // *Журн. прикл. спектроскопии.* 2012. Т. 79, № 1. С. 66–76.
11. Peculiarities in spectral behavior of optical characteristics of urban aerosols by laser sensing data and model estimations / V. V. Barun [et al.] // *Proc. SPIE.* 1999. Vol. 3983. P. 279–289.
12. Золотарев В. М., Морозов В. Н., Смирнова Е. В. Оптические постоянные природных и технических сред : справочник. Л., 1984.
13. Зуев В. Е., Креков Г. М. Оптические модели атмосферы. Л., 1986.
14. Ивлев Л. С., Андреев С. Д. Оптические свойства атмосферных аэрозолей. Л., 1986.
15. Креков Г. М., Звенигородский С. Г. Оптическая модель средней атмосферы. Новосибирск, 1990.
16. d'Almeida G. A., Koepke P., Shettle E. Atmospheric aerosols: global climatology and radiative characteristics. Hampton, 1991.
17. Rothman L. S. The HITRAN molecular spectroscopic database and hawks (Hitran Atmospheric Workstation): 1996 EDITION // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 1998. Vol. 60, № 5. P. 665–710.
18. Comparison of black carbon content, aerosol optical and microphysical characteristics in Moscow and the Moscow region / M. A. Sviridenkov [et al.] // Fifteenth ARM Science Team Meeting Proceedings (Daytona Beach, march 14–18, 2005). Daytona Beach, 2005. P. 140–147.
19. Свириденков М. А. Аппроксимация ван де Хюлста и микроструктура пылевого аэрозоля // *Физика атмосферы и океана.* 1993. Т. 29, № 2. С. 218–221.
20. Кугейко М. М., Лысенко С. А., Колчинский С. М. Двухлучевой лазерно-локационный метод определения оптических характеристик выбросов из труб промышленных предприятий // *Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика.* 2009. № 2. С. 14–19.
21. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Восстановление массовой концентрации пыли в промышленных выбросах из результатов оптического зондирования // *Оптика атмосферы и океана.* 2011. Т. 24, № 11. С. 960–968.
22. Mishchenko M. I., Travis L. D., Lacis A. A. Scattering, absorption and emission of light by small particles. New York, 2004.

Поступила в редакцию 29.10.2014.

**Сергей Александрович Лысенко** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информатики и компьютерных систем факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ.

**Михаил Михайлович Кугейко** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой квантовой радиофизики и оптоэлектроники факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ.

**Василий Васильевич Хомич** – аспирант кафедры информатики и компьютерных систем факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ. Научный руководитель – С. А. Лысенко.

УДК 536.2.01

А. Г. ПРОНЕВСКИЙ, М. С. ТИВАНОВ

## ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ БЕЗДЕФЕКТНЫХ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Предложена модель двумерной теплопроводности бездефектных однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ), основанная на известной модели теплоемкости Дебая и кинетической модели фононного теплопереноса, отличающаяся учетом длины ОУНТ путем уточнения модели Дебая на случай наноразмерных структур и вклада фонон-фононного рассеяния на основании формулы Клеменса. Учет длины приводится в контексте параметризации нижней частоты интегрирования в формуле Дебая.

С помощью данной модели установлены зависимости коэффициента двумерной теплопроводности бездефектных ОУНТ от их длины и температуры. Обнаружено, что полученные температурные зависимости коэффициента двумерной теплопроводности ОУНТ имеют выраженный максимум, положение которого по оси температур незначительно смещается в область больших температур при увеличении длины ОУНТ. Данное обстоятельство, в частности, определяет эффективный температурный интервал использования углеродных нанотрубок (УНТ) как элементов теплоотвода в устройствах наноэлектроники. Абсолютное значение максимума зависимости коэффициента двумерной теплопроводности от температуры возрастает при увеличении длины ОУНТ, постепенно достигая насыщения. Показаны небольшие отличия между значениями теплопроводности для бездефектных ОУНТ в зависимости от их хиральности («зигзаг», «кресло»).

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки; структура; теплопроводность.

The heat conduction model of defect-free SWCNTs was proposed. This model is based on the known Debye's model for heat capacity and on the kinetic model for the phonon heat transfer that takes into account the length of SWCNTs due to redetermining of Debye's model for the case of nanoscale structures and also of the contribution made by phonon-phonon scattering on the basis of Clemens's formula. The length is considered in the context of parameterization of the lower integration frequency in the Debye formula.

Based on this model, the dependences of the two-dimensional thermal conductivity of defect-free SWCNTs on their length and temperature were defined. It was found that the obtained temperature dependences of the two-dimensional thermal conductivity of defect-free SWCNTs have an obvious maximum slightly shifted on the temperature axis to higher temperatures with an increase in the length of SWCNTs. Particularly this aspect determines the effective temperature interval for the use of CNTs as heat-sink elements in nanoelectronic devices. The absolute value of a maximum at the curve for the two-dimensional thermal conductivity as a function of temperature is increased with the SWCNT length, gradually reaching saturation. Thermal conductivities for defect-free SWCNTs show insignificant differences as a function of their chirality («zigzag» or «armchair»).

**Key words:** carbon nanotubes; structure; thermal conductivity.

Благодаря хорошей электро- и теплопроводности [1], высоким значениям химической, термической и механической стабильности [1, 2] УНТ являются одним из наиболее перспективных объектов наноэлектроники [1–5].

Несмотря на огромный потенциал применения УНТ в области наноэлектроники в составе теплоотводящих устройств, известные модели по расчету их коэффициента теплопроводности дают различные результаты [6–11], экспериментально определенные значения коэффициента теплопроводности УНТ также существенно варьируются [12–14]. Одной из возможных причин такого расхождения является некорректное применение трехмерных представлений о теплопроводности и других физических явлений к двумерным структурам [15].

Цель настоящего исследования – разработать модель теплопроводности бездефектных ОУНТ с учетом их геометрических параметров и температуры.

### Модель теплопроводности бездефектных ОУНТ

Рассматривая ОУНТ как свернутый в цилиндр лист графена – двумерного объекта – будем говорить также и о двумерности ОУНТ. Применим к ОУНТ закон Фурье в двумерной форме [15], в котором коэффициент двумерной теплопроводности имеет размерность Вт/К.

Из элементарной теории переноса следует, что коэффициент двумерной теплопроводности можно представить в виде [15]

$$\kappa = \frac{1}{2} \rho v c_V L_B = \frac{1}{2 s_2} \frac{C_2}{\mu} v^2 \tau_B, \quad (1)$$

где  $v$  – групповая скорость фононов, так как связана непосредственно с переносом энергии;  $\rho$  – двумерная плотность материала;  $L_B$  – длина баллистичности – длина свободного пробега фонона;  $\tau_B$  – время